SK模型の数値解析(磁性体における新しいタイプの相転移現象,研究会報告)

根本, 幸児; 高山, 一

SK模型の数値解析

北大 理 根本幸児　　京大 基研 高山一

§1 序　スピングラス（SG）状態が一種の協力現象、相転移現象であるという立場から、EdwardsとAndersonによってその平均場理論が提起されて以来、新しいタイプの秩序相としてその理論的研究が精力的に行われてきた。特にSGの平均場理論の基本的解析は、Sherrington - Kirkpatrick（SK）模型を通して発展してきている。SK模型は次のハミルトニアンで記述される[1]。

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad , \qquad (S_i = \pm 1) \tag{1}$$

ここで$\{J_{ij}\}$は各々分散がN^{-1}（Nは全スピン数）平均が（簡単の為ここでは）零のガウス分布に従って、全てのスピン間に確率的に与えられる相互作用であり、hは一様外部磁場である。

SK模型の解析はレプリカ法によるところが大きい。レプリカ法の枠組では、SG相はレプリカ対称性の破れ（replica symmetry breaking : RSB）によって特徴づけられるが、有限のhでのSG転移はこれによって発見された（h－T面の相境界は特に発見者の名を冠してAT線とよばれている[2]）。SG相を記述する為には適当なRSBを仮定しなければならないが、現在知られている唯一の成功例はParisiによるRSB仮説である[3]。そしてこの仮説が致命的欠陥を指摘されていないという意味において、SK模型のレプリカ法による定式化は一応の結着がついたと考えられている。

これを受けて、物理的意味の不明瞭なRSBを、実スピン空間における事象、即ち多数の局所安定状態の発現（このことは所謂TAPの自由エネルギーの解析から知られている[4]）と結びつけて解釈する試みがなされている[5),6]。この対応関係が妥当なものであれば直接的な解析の困難な後者をレプリカ法を通して調べることができるので非常に興味深い考え方である。それだけにその妥当性を調べておくことは意味のあることである。これまで、計算機実験[7]、基底状態の数値解析[8]、さらに我々によるTAPの自由エネルギーの数値解析[9),10]等との比較から、対応関係の一部についてこれを支持する結果がでている。しかしまだ十分なものとはいえず、さらなる検討が望まれる所である。一方ParisiのRSB仮説による表式の具体的な解（Parisi解）もそれほど知られている訳ではない。これは数値計算からも難しい部類の問題であるが、上述の比較検討の為にも系統的にその解をおさえておく必要があろう。このような事情で、我々は、大概的ではあるが、h－T面上でのParisi解による物理量、秩序変数の振舞を数値的に求めたので、ここではその結果を紹介したい。なお、レプリカ法とParisiによるRSB仮説、及び実スピン空間との対応解釈についての概略は文献11）を参照して頂くとして、ここでは省かせて頂きます。

§2 Parisi解の解法　ParisiのRSB仮説によれば、$\{J_{ij}\}$について平均化された自由エネルギーは次のように与えられる。[3)]

$$f = \underset{q}{\mathrm{Max}}\, f_P[q]$$

$$f_P[q] = -\frac{\beta}{4}\left\{1-2q(1)+\int_0^1 dx\, q(x)^2\right\} - \int_{-\infty}^{\infty} dy\,(2\pi q(0))^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(y-h)^2}{2q(0)}}\, g(0,y) \qquad (2)$$

ここで、$q(x)$ は $0 \leq x \leq 1$ で定められる秩序関数，$g(x,y)$ $(0 \leq x \leq 1, -\infty < y < \infty)$ は次の偏微分方程式の解として与えられる二変数関数である。

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{1}{2}\frac{dq}{dx}\left\{\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \beta x\left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)^2\right\}, \quad g(1,y) = T\log 2\cosh\beta y \qquad (3)$$

即ち、$g(0,y)$が上式を通して $q(x)$に依存しているので、このままでは$f_P[q]$の停留問題を数値的に解くことは非常に困難である。そこでLagrange の未定乗数法を用いることが考え出された。[12)] 未定乗数を $P(x,y)$ $(0 \leq x \leq 1, -\infty < y < \infty)$ とすれば、新しい関数

$$\tilde{f}_P = f_P[q] - \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(1,y)\{g(1,y) - T\log 2\cosh\beta y\} + \int_0^1 dx \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(x,y)\left[\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{dq}{dx}\left\{\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \beta x\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)^2\right\}\right] \qquad (4)$$

の q, g, P に関する停留問題に帰着する。$P(x,y)$, $P(1,y)$についての汎関数微分から(3)が導びかれるが，$M(x,y) \equiv \frac{\partial}{\partial y} g(x,y)$ を定義しておくと都合がよい。そうすると結局

$$\frac{\partial M}{\partial x} = -\frac{1}{2}\frac{dq}{dx}\left\{\frac{\partial^2 M}{\partial y^2} + 2\beta x M \frac{\partial M}{\partial y}\right\}, \quad M(1,y) = \tanh\beta y \qquad (5)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{dq}{dx}\left\{\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} - 2\beta x \frac{\partial}{\partial y} MP\right\}, \quad P(0,y) = (2\pi q(0))^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(y-h)^2}{2q(0)}} \qquad (6)$$

$$q(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(x,y)\, M(x,y)^2 \qquad (7)$$

となって、これらの連立方程式を自己無撞着に解けばよろしいということになる。実際の数値計算では，(5), (6) を線型項のグリーン関数を用いて積分方程式に変換してから，x について20点，y について100点に分割して，(5)→(6)→(7)→(5) の順で反復代入により解を求めている。

§3 計算結果　Parisi解の大概的な振舞を調べる為、前節の方法を用いて $0.2\leq T\leq 0.9$ (0.1きざみ)，$0.0\leq h\leq 0.5$ (0.1きざみ)の範囲において数値解を求めた。特にここで示したいのはエントロピー S と磁化 m である。これらは g, M, P を用いて次のように表わされる。

$$S = -\frac{\beta^2}{4}\{1-g(1)\}^2 + \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(1,y)\{\log 2\cosh\beta y - \beta y\tanh\beta y\} \tag{8}$$

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} dy\, P(x,y) M(x,y) \quad , x\text{-independent} \tag{9}$$

((9)が x に依存しないことは(5),(6)から容易に知れる)。その結果が図1,図2である。これをみるとParisi-Toulouse (PaT)仮説[13]がよく成り立っているようにみえる。PaT

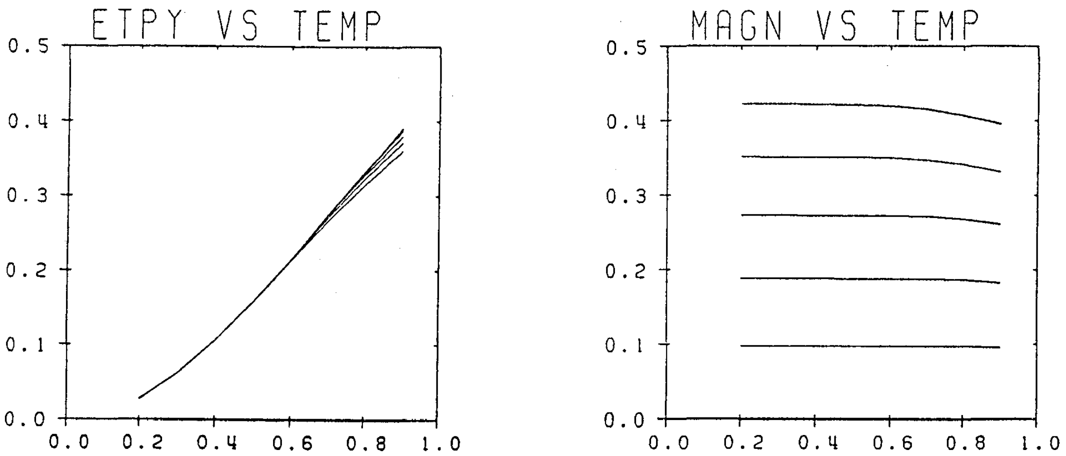

図1　エントロピー(左)と磁化(右)の温度依存性　$h = 0.0\sim(0.1)\sim 0.5$

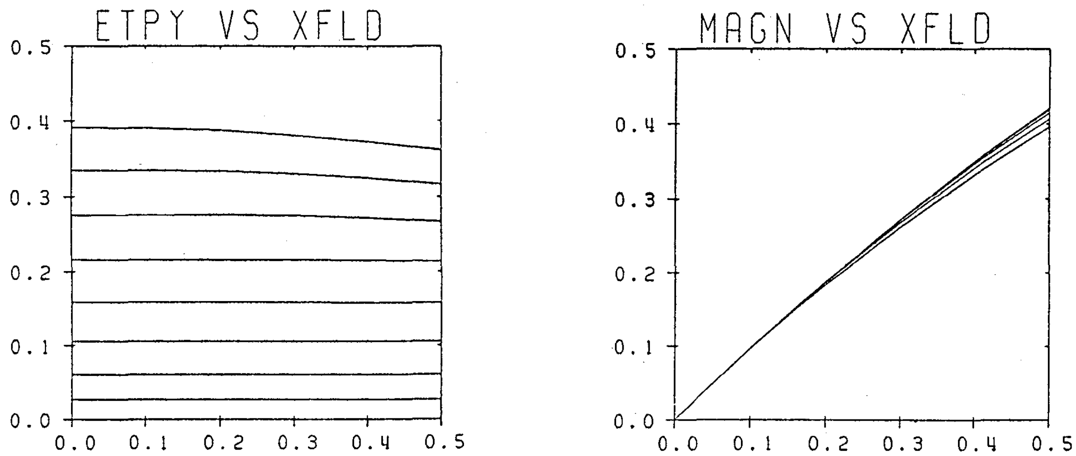

図2　エントロピー(左)と磁化(右)の磁場依存性　$T = 0.2\sim(0.1)\sim 0.9$

仮説とは，SG相において自由エネルギーが $f(T,h)=f_1(T)+f_2(h)$ となり，従って，$\partial m/\partial T=\partial S/\partial h=0$ が成り立つとする予想である。もしこの仮説が正しければ $h-T$ 面上のSG相の様子がAT線上の情報だけで知ることができる訳だが，図はそのことを物語っている。

次に $g(x)$, $M(x,y)$, $P(x,y)$ の振舞について述べてみよう。図3に典型的な磁場依存性の例を示す。このような図を色々ながめていて気づいた点を列挙してみる。

i) $g(x)$ は図式的に図4のような関数形をもつ。すなわち，

$$g(x)=\begin{cases} g_0(h) & \text{for} \quad 0\leq x\leq x_0 \\ Q(x/T) & \text{for} \quad x_0\leq x\leq x_1 \\ g_1(T) & \text{for} \quad x_1\leq x\leq 1 \end{cases} \tag{10}$$

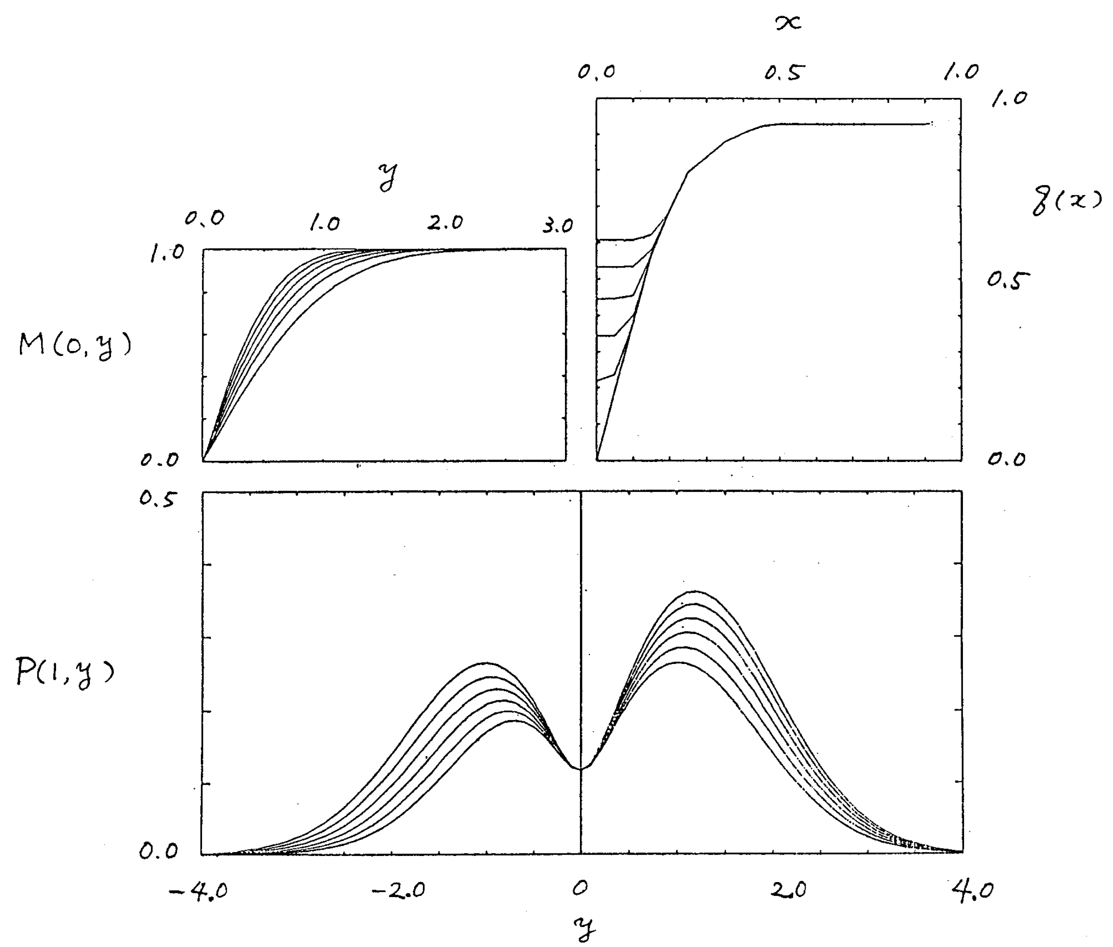

図3　$M(0,y)$（左上），$g(x)$（右上），$P(1,y)$（下）の磁場依存性
$T=0.2$，$h=0.0\sim(0.1)\sim0.5$

ここで$Q(z)$はT, hに依らないスケーリング関数であり、x_0, x_1は$Q(x_0/T)=g_0(h)$, $Q(x_1/T)=g_1(T)$で決定される。AT線は$x_0=x_1$, 或いは$g_0(h)=g_1(T)$で特徴づけられる。これはPaTのスケーリング仮説の拡張になっている。[13]

ii) $\bar{g}\equiv\int_0^1 dx\, g(x)$なる変数を定義したとき、SG相における関数形が

$$\bar{g} = 1 - A(h)\cdot T \qquad (11)$$

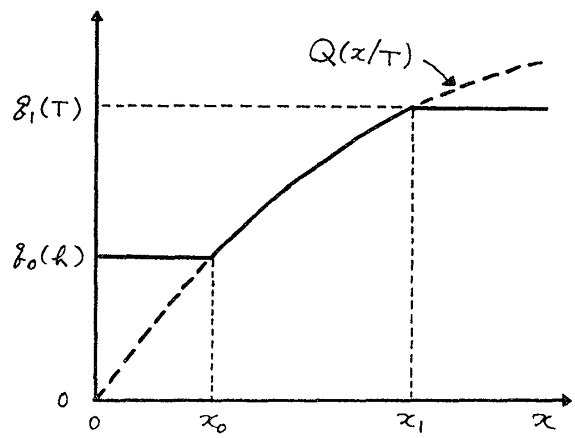

図4　$g(x)$の模式図

すなわち、$\bar{g}$はTに関して高々一次関数である。これは(10)を仮定すると簡単に導出できる。特に$h=0$では$\partial m/\partial h=\beta(1-\bar{g})$という関係があるので帯磁率が一定となる。

iii) SG相において$M(0,y)$はTに依存しない。これは(9)で$x=0$とすればわかるように、$\partial m/\partial T$を保証するより強い予想である。特にAT線を$T_c(h)$とすれば、$M(0,y)=\tanh(y/T_c(h))$と表わされる。

iv) SG相において$P(1,0)$はhに依存しない。これはそれほど明瞭な意味をもたないが、低温においては(8)で$T\to 0$とすれば$\partial S/\partial h=0$との関係があるように思える。

$P(1,y)$は各スピンに働く内部磁場yの分布関数と解釈することができる[6),12)]（(8);(9)において$\tanh\beta y$を誘起される磁化と考えると理解しやすい）。実際TAPの方法による結果から知れる内部磁場分布とある程度の一致をみせている。[10)]

<u>§4　おわりに</u>　以上、目につく特徴をあげたが、これらは数値的にその様に見えるという意味であって解析的に確証されたことではない。しかしi)~iv)のいくつかをPaT仮説の拡張として考えてみることは、Parisi解の解析的性質を調べる上で興味深いことである。真にSK模型が、そのParisi解によって、多数の局所安定状態を統計力学的に取り扱うことのできる模型であれば、逆にその視点から何程のことが知れるのだろうか？　例えば、SG相の局所安定状態が階層性をもっていると予想されており[6)]、一般にその時の動的な振舞（異常緩和現象）等も論じられているが[14)]、このような階層性をもつことは何が本質的なのか、といった問題は、競合するスピン系を理解する上でも重要であると思われる。このような意味で、SK模型を巡る議論は新たな局面を迎えているといえよう。

REFERENCES

1) D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35** (1975) 1972

2) J. R. L. Almeida and D. J. Thouless, J. Phys. **A11** (1978) 983

3) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 1754, J. Phys. **A13** (1980) L115, 1101, 1887

4) A. J. Bray and M. A. Moore, J. Phys. **C13** (1980) L469

5) G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **50** (1983) 1946

6) M. Mézard, G. Parisi, N. Soulas, G. Toulouse and M. Virasoro, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 1156, J. Physique **45** (1984) 843

M. Mézard and M. Virasoro, J. Physique **46** (1985) 1293

7) A. P. Young, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 1206

8) N. Parga, G. Parisi and M.Virasoro, J. Physique **46** (1984) L1063

9) K. Nemoto and H. Takayama, J. Phys. **C18** (1985) L529, J. Magn. Magn. Mater. **54-57** (1986) 135

10) K. Nemoto and H. Takayama, in preparation

11) 高山 一，日本物理学会誌 41 (1986) 244

12) H. J. Sommers and W. J. Dupont, J. Phys. **C32** (1984) 5785

13) G. Parisi and G. Toulouse, J. Physique Lett. **41** (1980) L361

J. Vannimenus, G. Toulouse and G. Parisi, J. Physique **42** (1981) 565

14) e. g., G. Paradin, M. Mézard and C. de Dominicis, J. Physique Lett. **46** (1985) L985